

РАЗРАБОТКА ПОДХОДОВ ПО СОЗДАНИЮ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ТИТАНА, МЕХАНИЧЕСКИ СОВМЕСТИМЫХ С БИОТКАНЯМИ

Гриб С.В., Колосова Е.В., Хамитов А.А., Горелов В.С.

Руководитель: доц., к.т.н. Илларионов А.Г.

ФГАОУ ВПО УрФУ, г Екатеринбург, illarionovag@mail.ru

Титановые сплавы находят все большее применение в медицине для изготовления имплантов в ортопедии, кардиологии, стоматологии, благодаря достаточно высокому уровню прочности, коррозионной стойкости, лучшей биосовместимости среди металлических биоматериалов, таких как сплавы на основе кобальта и нержавеющей сталь. Главные требования, которые предъявляются металлическим биоматериалам являются низкий модуль нормальной упругости, сравнимый с модулем кости человека, который составляет менее 30 ГПа [1], а также отсутствие токсичности легирующих элементов, входящих в состав сплава. Первоначально, большое внимание уделялось промышленным ($\alpha+\beta$)-титановым сплавам, таким как Ti-6Al-4V и Ti-6Al-7Nb [1]. Однако, эти сплавы характеризовались высокой степенью биомеханической несовместимости, вследствие их относительно высокого модуля упругости (110...120 ГПа) [1]. Кроме того, эти сплавы высвобождают токсичные ионы ванадия и алюминия в организм человека, что приводит к долгосрочным процессам восстановления. В настоящее время, исследования в области создания биоматериалов, сфокусированы на новых β -сплавах титана [1...5], которые обладают более низким модулем нормальной упругости (42...85 ГПа) по сравнению с ($\alpha+\beta$)-титановыми сплавами, а также не содержат токсичные элементы. В частности, разработка металлических биоматериалов на основе системы Ti-Nb-Zr(-Ta) является перспективным направлением в науке [4]. Данная система представляет интерес исходя из следующих принципов [2, 5]:

- во-первых, такие элементы как титан, цирконий, ниобий, тантал являются нетоксичными, вследствие чего не вызывают неблагоприятных реакций в организме человека;

- во-вторых, ниобий, в меньшей степени, тантал действуют как β -стабилизаторы и, при достаточном содержании, способны стабилизировать β -фазу при закалке, что является важным, с точки зрения уровня модуля упругости, так как именно в метастабильном β -состоянии он стремится к минимуму (β -фаза с объемно-центрированной кристаллической решеткой характеризуется более низким модулем нормальной упругости по сравнению с гексагональной плотноупакованной α -фазой). Цирконий, обычно, во всех титановых сплавах, выступает в качестве нейтрального упрочнителя, однако, как показано в [2] в β -титановых сплавах цирконий может оказывать и β -стабилизирующее

действие понижая температуру мартенситного превращения, а также подавляя образование атермической ω -фазы.

- в-третьих, титан, ниобий и тантал имеют близкие значения атомных радиусов (0,145...0,146 нм), тогда как цирконий характеризуется большим атомным радиусом (0,160 нм). Следовательно, при легировании титана ниобием и танталом период решетки β -фазы должен, по крайней мере не уменьшаться, тогда как легирование титана цирконием должно способствовать увеличению межатомного расстояния в сплаве, уменьшению силы связи между атомами, а, следовательно, уменьшению и модуля упругости.

Для того чтобы определиться с конкретными составами сплавов системы Ti-Nb-Zr(-Ta) в [2, 5] предлагают оценивать значения следующих параметров:

- электронная концентрация в сплаве

$$e/a = \frac{1}{100} \sum_{i=1}^k (v_i \cdot c_i), \quad (1)$$

где v_i – суммарное число валентных электронов химических элементов сплавов, являющиеся общими для данной системы (сплава); c_i – содержание i -го элемента в сплаве, ат. %; k_i – количество легирующих элементов в сплаве.

- средняя кратность химической связи (\overline{Bo}) и средний энергетический уровень d -орбитали (\overline{Md}) сплава

$$\overline{Bo} = \frac{1}{100} \sum_{i=1}^k (Bo_i \cdot c_i), \quad (2)$$

$$\overline{Md} = \frac{1}{100} \sum_{i=1}^k (Md_i \cdot c_i), \quad (3)$$

где Bo_i - кратность химической связи легирующих элементов; Md_i - энергетический уровень d -орбитали легирующих элементов, эВ.

Электронная концентрация может принимать некоторое критическое значение, при котором β -твердый раствор будет характеризоваться минимальным модулем упругости. Интервал возможных критических значений e/a , для β -титановых сплавов, достаточно обширен и составляет 4,21...4,24 эл/ат [5]. Стоит отметить, что в формуле (1) не учитывается влияние легирующих элементов на объем элементарной ячейки β -титана, а следовательно и на значение электронной концентрации. Нами был введен поправочный коэффициент $V_{\beta Ti}/V_{\beta Ti-л.э.}$, который учитывал это влияние. Таким образом, расчетная формула для нормированного значения электронной концентрации следующая:

$$e/a_n = e/a \cdot [V_{\beta\text{Ti}}/V_{\beta\text{Ti-л.э.}}], \quad (4)$$

где $V_{\beta\text{Ti}}$ и $V_{\beta\text{Ti-л.э.}}$ – объемы элементарных ячеек β -титана и β -твердого раствора сплава Ti-л.э. соответственно.

Согласно [2], с точки зрения параметров \overline{Bo} и \overline{Md} , химический состав β -сплава подбирается таким образом, чтобы согласно диаграмме приведенной на рисунке попасть в область близко прилегающую к границе $\beta/\beta+\omega+\alpha''$ со стороны β -области, так как именно на той границе величина модуля нормальной упругости должна быть минимальной.

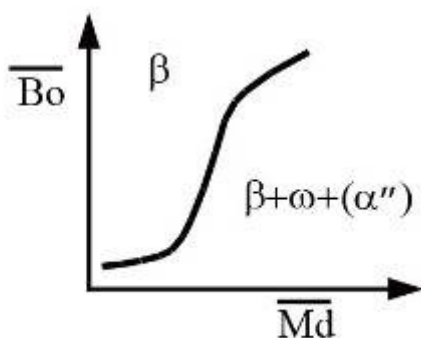


Рисунок. Схема \overline{Bo} - \overline{Md} -диаграммы, на которой изображена $\beta/\beta+\omega+(\alpha'')$ – граница

В настоящее время проводится расчет экспериментальных составов сплавов с целью их оптимизации, для получения минимальных характеристик модуля.

Используемые литературные источники:

1. *Mitsuo Niinomi*. Recent research and development in titanium alloys for biomedical applications and healthcare goods // Science and Technology of Advanced Materials. 2003. № 4. P. 445...454.
2. *Mochamed Abdel-Hady, Keita Hinoshita, Masahiko Moriaga*. General approach to phase stability and elastic properties of β -type Ti-alloys using electronic parameters // Scripta Materialia. 2006. №55. P. 477...480.
3. *D. Kenta, G. Wang, Z. Yu u др.* Pseudoelastic behaviour of a β Ti–25Nb–3Zr–3Mo–2Sn alloy // Materials Science and Engineering. 2010. A 527. P. 2246...2252.
4. *L.M. Elias, S.G. Schneider, S. Schneider u др.* Microstructural and mechanical characterization of biomedical Ti–Nb–Zr(–Ta) alloys // Materials Science and Engineering. 2006. A 432. P. 108...112
5. *Hideaki Ikehata, Naoyuki Nagasako, Tadahiko Furuta, u др.* First-principles calculations for development of low elastic modulus Ti alloys // Physical Review. 2004. B 70. P. 174113 1...8.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ-Укр_а № 10-08-90413